

(19)日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11)特許出願公開番号

特開平5-282383

(43)公開日 平成5年(1993)10月29日

(51)IntCl.⁵

識別記号

庁内整理番号

FI

技術表示箇所

G 0 6 F 15/42

A 7060-5L

C 0 7 K 13/00

8619-4H

G 0 1 N 35/00

A 8310-2J

G 0 6 F 15/60

4 0 0 K 7922-5L

審査請求 未請求 請求項の数1(全 11 頁)

(21)出願番号

特願平4-74903

(22)出願日

平成4年(1992)3月31日

(71)出願人 000005223

富士通株式会社

神奈川県川崎市中原区上小田中1015番地

(72)発明者 松尾 洋

神奈川県川崎市中原区上小田中1015番地

富士通株式会社内

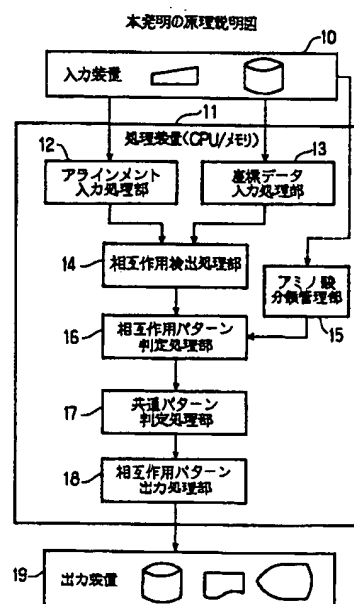
(74)代理人 弁理士 小笠原 吉義 (外2名)

(54)【発明の名称】 蛋白質分子立体構造解析装置

(57)【要約】

【目的】蛋白質分子の局所構造のアラインメントをもとに、それら局所構造に共通して見られる特徴的な環境との相互作用のパターンを検出する蛋白質分子立体構造解析装置に関し、蛋白質分子の立体構造形成の解明に有意義なアミノ酸配列のパターンを抽出する装置を提供することを目的とする。

【構成】蛋白質分子の局所構造のアラインメントと、各局所構造が属する蛋白質分子に関する座標データを入力する。それをもとに、相互作用検出処理部14により局所構造中の各アミノ酸残基と環境との相互作用を検出する。アミノ酸残基と環境との相互作用のパターンを、アミノ酸に関する所定の分類に基づいて判定し、そのパターンのそれぞれのうち、所定個以上の局所構造に出現しているものを抽出する。相互作用パターン出力処理部18は、所定個以上の局所構造に出現していると判定されたパターンを持つ環境との相互作用に関する情報を出力する。



【特許請求の範囲】

【請求項1】 命令を実行するプロセッサ(11)と、データを入力する入力装置(10)と、データを出力する出力装置(19)とを備え、アミノ酸配列からなる蛋白質分子の立体構造を解析する蛋白質分子立体構造解析装置であって、蛋白質分子の局所構造のアラインメントを入力するアラインメント入力処理手段(12)と、各局所構造が属する蛋白質分子に関する座標データを入力する座標データ入力処理手段(13)と、局所構造中の各アミノ酸残基と環境との相互作用を検出する相互作用検出処理手段(14)と、アミノ酸に関する所定の分類に基づいて、アミノ酸残基と環境との相互作用のパターンを判定する相互作用パターン判定処理手段(16)と、アラインメントの各位置について環境との相互作用のパターンのそれぞれのうち、所定個以上の局所構造に出現しているものを判定する共通パターン判定処理手段(17)と、所定個以上の局所構造に出現していると判定されたパターンを持つ環境との相互作用に関する情報を出力する相互作用パターン出力処理手段(18)とを備えたことを特徴とする蛋白質分子立体構造解析装置。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】 本発明は、蛋白質分子の局所構造のアラインメントをもとに、それらの局所構造に共通して見られる特徴的な環境との相互作用のパターンを検出することにより、蛋白質分子の立体構造形成メカニズムの解明等を支援する蛋白質分子立体構造解析装置に関する。

【0002】 蛋白質分子がどのような機能を発揮するかは、その立体構造に依存している。ところが、多くの場合、蛋白質分子の立体構造を実験的に求めることは困難である。このため、ワクチン等の医薬品開発・新機能材料の設計・生体内の複雑な生理機能のメカニズムの解明等の課題の解決のために、蛋白質分子の立体構造をそのアミノ酸配列から予測する方法の開発が要求されている。

【0003】

【従来の技術】 蛋白質分子の立体構造を実験的に求めることは困難とはいえ、1958年イギリスのケンドルーらによって、はじめて蛋白質分子(ミオグロビン)の立体構造が実験的に求められて以来、現在に至るまで、かなりの数に上る立体構造が報告されている。これらの立体構造を観察することによって、いくつかの蛋白質に共通して出現する局所的な構造パターン(構造モチーフ)が存在することが分かっている。

【0004】 そこで、これらの構造パターンに特徴的なアミノ酸配列のパターンを抽出することによって、アミノ酸配列を立体構造へと結び付ける経験則を構築し、立体構造予測に役立てようというアプローチが、近年盛んになってきている。

【0005】 これまで、構造パターンに特徴的なアミノ酸配列上のパターンの抽出は、その構造パターンを有するいくつかの局所構造のアラインメントを作成し、アラインメントの各位置について特有のアミノ酸のパターンが存在するかどうかを調べることによって行われてきた。

【0006】 しかしながら、この方法によっては必ずしも有意義なアミノ酸配列のパターンを抽出し得ない場合があった。その一つの理由は、アミノ酸配列のパターンを抽出する際に局所構造内のアミノ酸配列しか考慮していなかったためと思われる。蛋白質分子の立体構造の形成には、アミノ酸配列上必ずしも近接していないアミノ酸残基間の相互作用が大きく寄与しているとの説と併せ考えれば、局所構造とそれを取り巻く環境を形成するアミノ酸残基との間の相互作用に特徴的なものが存在しないかどうかをも考慮する必要がある。

【0007】

【発明が解決しようとする課題】 従来技術では、局所構造のアラインメントについて、特徴的なアミノ酸配列上のパターンを抽出しようとするとき、一般に局所構造内のアミノ酸配列上近接している部分の相互作用しか考慮していなかったため、抽出したパターンを解析しても、蛋白質分子の立体構造を予測するための原理の究明や方法の開発に十分なデータが得られるとは限らなかった。また、特徴的なアミノ酸配列上のパターン抽出の際には、立体図を詳細に吟味するなどの主観が混じりやすい手間のかかる作業が必要であるという問題があった。

【0008】 本発明は上記問題点の解決を図り、局所構造のアラインメントが与えられたとき、アラインメントの各位置におけるアミノ酸残基とその残基の環境との間の相互作用に、共通したパターンが存在しないかどうかを判定することにより、構造形成の解明に有意義なアミノ酸配列のパターンを抽出する装置を提供することを目的とする。

【0009】

【課題を解決するための手段】 図1は本発明の原理説明図である。入力装置10は、外部記憶装置やキーボード装置などのデータを入力する装置である。処理装置11は、CPUおよびメモリなどを備え、アミノ酸配列からなる蛋白質分子の立体構造を解析するプログラムを実行する装置である。

【0010】 アラインメント入力処理部12は、蛋白質分子の局所構造のアラインメント、すなわち各局所構造の各アミノ酸残基が、他の局所構造のどのアミノ酸残基と対応しているかを定義する情報を入力する処理手段である。

【0011】 座標データ入力処理部13は、蛋白質分子の座標データを入力する処理手段である。座標データは、例えば蛋白質分子を構成する各原子に対して、3次元空間内における座標、およびその原子の属するアミノ

酸残基番号等を定義したものである。

【0012】相互作用検出処理部14は、局所構造中の各アミノ酸残基と環境との相互作用を検出する処理手段である。ここでは、局所構造中のアミノ酸残基とそれに接触しているアミノ酸残基の対を相互作用として検出する。

【0013】アミノ酸分類管理部15は、あらかじめ定められたアミノ酸の分類情報を保持する手段であって、ある特定の性質を示すアミノ酸の集合を定義した情報を管理するものである。相互作用パターン判定処理部16は、このアミノ酸に関する分類に基づいて、アミノ酸残基と環境との相互作用のパターンを判定する処理手段である。

【0014】共通パターン判定処理部17は、アラインメントの各位置について環境との相互作用のパターンのそれぞれのうち、所定個以上の局所構造に出現しているものを判定し、抽出する処理手段である。相互作用パターン出力処理部18は、共通パターン判定処理部17によって抽出されたパターンを持つ環境との相互作用に関する情報を、出力装置19に出力する処理手段である。

【0015】

【作用】図2は、本発明の作用説明図である。図中、 r_i はアミノ酸残基、 S_i は局所構造、20-1~20-3は蛋白質分子を表す。

【0016】蛋白質分子は、図2の(イ)に示すように、多数のアミノ酸がその蛋白質に特有の順番で線上に重合することにより合成されたものであり、エネルギー的に安定なある特定の立体構造へと折り畳まる。蛋白質の機能は、蛋白質がこのような特定の立体構造を形成することによって発現されるため、立体構造を形成するメカニズムを解明し、例えば、あるアミノ酸配列から蛋白質分子の立体構造を予測できるようにすることが望まれる。

【0017】立体構造を形成するメカニズムを解明する方法の一つとして、いくつかの蛋白質に共通して出現する局所的な構造パターンについて、その中から特徴的なアミノ酸配列のパターンを抽出し、解析することが有力であると考えられる。本発明は、その特徴的なアミノ酸配列のパターンを抽出する際に、単に局所構造内のアミノ酸配列のみを考慮するのではなく、その周囲に存在するアミノ酸残基との相互作用についても考慮する。

【0018】例えば、図2の(ロ)に示すように、3つの蛋白質分子20-1、20-2、20-3中に、似たような構造を持つ局所構造 S_1 、 S_2 、 S_3 があったとする。アラインメント入力処理部12により、この局所構造のアラインメントを入力する。また、座標データ入力処理部13により、各蛋白質分子の座標データを入力する。そして、局所構造 S_1 、 S_2 、 S_3 の中の各アミノ酸残基のそれぞれについて、環境との相互作用を検出する。

【0019】図2の(ハ)に示すように、例えばアミノ酸残基 r_{11} と相互作用を持つアミノ酸残基が r_{1a} 、 r_{1b} 、 r_{1c} であった場合、アミノ酸残基 r_{11} とこれらの各アミノ酸残基 r_{1a} 、 r_{1b} 、 r_{1c} との対が、どのようなアミノ酸の分類に従ったパターンになっているかを、相互作用パターン判定処理部16により調べる。対応するアミノ酸残基 r_{21} およびアミノ酸残基 r_{31} についても同様に調べる。

【0020】こうして調べた相互作用のパターンが、各局所構造 S_1 、 S_2 、 S_3 のアラインメントの位置に共通に現れれば、その相互作用のパターンに関係した影響を、各局所構造のアミノ酸残基がその環境から受け、似たような構造を形成する一因になっている可能性がある。と判断することができる。

【0021】本発明によれば、このような蛋白質分子局所構造の各アミノ酸残基と環境との相互作用およびそのパターンを、明確に定義された特定の手続きによって求めることができ、問題としている局所構造のアラインメントとそれらの局所構造が属する蛋白質分子の座標データを入力した後は、ユーザーの介入なしに自動的に結果を出力することができる。

【0022】

【実施例】図3は本発明の実施例の処理説明図である。以下、図3に示す処理①~⑥に従って説明する。

【0023】① アラインメント入力処理部12により、N個の蛋白質分子局所構造のアラインメントを入力する。Nは2以上の任意の整数である。アラインメントとは、各局所構造の各アミノ酸残基が、他の局所構造のどのアミノ酸残基と対応しているかを定義したものである。対応関係は原則として一対一でなければならない。また、局所構造のアミノ酸残基間の対応関係はつじつまが合ったものでなければならない。例えば、ある局所構造 S_1 の残基aが、局所構造 S_2 の残基b、局所構造 S_3 の残基cに対応づけられている場合、 S_2 の残基bは S_3 の残基cに対応づけられていなければならない。

【0024】② 座標データ入力処理部13により、N個の局所構造が属する蛋白質分子の座標データを入力する。座標データとは、蛋白質分子を構成する各原子に対して、3次元空間内における座標、およびその原子の属するアミノ酸残基番号を定義したものである。さらに、後述する原子間の接触の判定に必要であれば、その原子の種類、またはそれが属するアミノ酸残基種に関する定義情報を入力する。

【0025】③ 相互作用検出処理部14により、各局所構造の各アミノ酸残基について、それが接触しているアミノ酸残基を検出する。アミノ酸残基と、それが接触しているアミノ酸残基の対のことを、ここでは、「そのアミノ酸残基と環境との相互作用」と呼ぶ。ただし、2つのアミノ酸残基が「接触している」とは、それらアミ

ノ酸残基が空間中で十分近接している状態のことをいう。接触しているか否かは、所定の手続きによって判定可能である必要がある。換言すれば、接触しているか否かを判定できれば、その具体的な手続きは任意である。

【0026】ここで、各局所構造 S_i における各アミノ酸残基 r_{ij} と環境との相互作用は、残基 r_{ij} と接触している残基を a, b, c, \dots とすれば、 $(r_{ij}, a), (r_{ij}, b), (r_{ij}, c), \dots$ というような対として求められる。

【0027】④ 相互作用パターン判定処理部16は、アミノ酸分類管理部15で管理されているアミノ酸の分類を用いて、処理③で検出された局所構造中の各アミノ酸残基と環境との相互作用のパターンを定義する。アミノ酸の分類とは、ある特定の性質を示すアミノ酸の集合 A_1, A_2, \dots を定義したもののことである。どのような性質を考慮し、いくつの集合を定義するかは任意である。

【0028】例えば、処理③により、ある局所構造 S_i のあるアミノ酸残基 r_{ij} と環境との相互作用 (r_{ij}, a) が検出されたとする。ここで、 a は r_{ij} と接触しているあるアミノ酸残基である。アミノ酸の分類において、 r_{ij} は A_m, A_n に属しており、 a は A_k, A_l に属しているとする。このとき、相互作用 (r_{ij}, a) のパターンは、 $(A_m, A_k), (A_m, A_l), (A_n, A_k), (A_n, A_l)$ である。

【0029】⑤ 共通パターン判定処理部17により、処理①で入力されたアラインメントの各位置について、 N 個中 N_t 個以上の局所構造に見られる相互作用のパターンを検出する。 N_t は、1以上 N 以下の整数であり、ユーザーによって任意に定義されるパラメタである。なお、相互作用のパターンの比較において、 (A_m, A_k) と (A_k, A_m) は区別してもしなくてもよいものとする。すなわち、対の中の要素の順序を考慮してもしなくてもよい。

【0030】⑥ 相互作用パターン出力処理部18は、アラインメントの各位置について、処理⑤で検出されたパターンを有する相互作用を、プリンタ、ディスプレイまたは外部記憶装置等の出力装置19に出力する。

【0031】図4は、本発明の実施例に係るアラインメント入力処理部により入力する局所構造のアラインメントの例を示す図である。ここでは、局所構造としてアルコール脱水素酵素の第192残基から第236残基までの45残基からなる局所構造、乳酸脱水素酵素の第20残基から第69残基までの50残基からなる局所構造、グリセルアルデヒド-3リン酸脱水素酵素の第2残基から第46残基までの45残基からなる局所構造の3個の局所構造を問題とした。

【0032】入力するアラインメントの表記方法は、局所構造における残基間の一対一の対応関係を定義したものであれば、どのような表記方法でもよいが、ここで

は、通常用いられる方法に従って、各残基のアミノ酸種を行列形式に配置して表記してある。行列の各行は、各局所構造のアミノ酸配列を示しており、各列は、局所構造間でのアミノ酸残基の対応関係を示している。

【0033】ある局所構造で隣接している残基が別の局所構造の隣接しない残基に対応づけられている場合には、必要な数だけギャップ(-)を挿入してある。また、3個以上の局所構造のアラインメントの場合、局所構造のアミノ酸残基間の対応関係はつじつまがあったものでなければならない。例えば、ある局所構造 S_1 の残基 a が、局所構造 S_2 の残基 b 、局所構造 S_3 の残基 c に対応づけられている場合、 S_2 の残基 b は S_3 の残基 c に対応づけられていなければならない。

【0034】なお、本実施例において、アルコール脱水素酵素の座標データはPlappとEklund、乳酸脱水素酵素分子の座標データはAbad-ZapateroとRossmann、グリセルアルデヒド-3リン酸脱水素酵素の座標データはSkarzynski、MoodyとWonacottによって定義され、アメリカ合衆国ブルックヘブン国立研究所が発行しているProtein Data Bankに収められたものを用いた。

【0035】相互作用検出処理部14によるアミノ酸残基間の接触の判定は、本実施例では以下の手続きによって行なった。蛋白質分子中の各原子について、その座標位置を中心とする一定の半径をもった球を考える。球の半径は、原子の種類毎に定まったファンデルワールス半径と水分子の半径との和によって定める。原子種毎のファンデルワールス半径および水分子の半径は、ユーザーによって任意に定義されてよいが、標準的には次の値を用いる。

【0036】芳香環中の炭素： 1.75,
カルボキシル基およびカルボニル基中の炭素： 1.55,
それ以外の炭素： 2.00,
窒素： 1.55,
酸素： 1.40,
硫黄： 2.00,
水分子： 1.40。

【0037】ここで、単位はオングストロームである。2つの原子は、それらに対する球が接触または交わっていれば、接触しているとみなす。2つのアミノ酸残基は、それぞれを構成する原子の中に接触している対が存在するとき、接触していると判定する。なお、本実施例では、アミノ酸残基の側鎖間の相互作用に注目するとの立場から、アミノ酸残基の側鎖中の原子同士の接触のみを考慮した。

【0038】問題の局所構造のアミノ酸残基と接触している残基を上記の手続きによって求めた例を、以下に示す。ここでは、図4のアラインメントの第5番目の位置に相当する各局所構造のアミノ酸残基(アルコール脱水

素酵素の第196残基、乳酸脱水素酵素の第24残基、グリセルアルデヒド-3リン酸脱水素酵素の第5残基) についての結果のみを示す。

【0039】〔環境との相互作用〕

(1) アルコール脱水素酵素の第196残基(A)について

接触している残基=第254残基(L), 第262残基(V), 第265残基(S)

すなわち、アルコール脱水素酵素の第196残基のアラニン(A)と環境との相互作用は、アラニン(A)と、第254残基のロイシン(L), 第262残基のバリン(V), 第265残基のセリン(S)との、3対である。

【0040】したがって、第196残基と環境との相互作用は、(A, L), (A, V), (A, S) である。

(2) 乳酸脱水素酵素の第24残基(T)について
接触している残基=第51残基(V), 第86残基(S), 第89残基(S)

したがって、第24残基と環境との相互作用は、(T, V), (T, S), (T, S) である。

【0041】(3) グリセルアルデヒド-3リン酸脱水素酵素の第5残基(G)について

接触している残基=第89残基(V)

したがって、第5残基と環境との相互作用は、(G, V) である。

【0042】相互作用パターン判定処理部16が用いるアミノ酸の分類は、本実施例では、図5に示したものをを用いた。すなわち、H(疎水性), P(極性), + (正の電荷), - (負の電荷) の4つの集合を定義した。各集合に属するアミノ酸は、図中、1文字表記で示してある。なお、一般に、同一のアミノ酸が複数の集合に属していても構わない。

【0043】図5に示すアミノ酸の分類を用いて、例えば図4のアラインメントの5番目の位置に相当する各局所構造のアミノ酸残基の環境との相互作用のパターンを定義すると、以下のようになる。

【0044】〔環境との相互作用のパターン〕

(1) アルコール脱水素酵素の第196残基(A)について

環境との相互作用は、(A, L), (A, V), (A, S)。

【0045】Aは H(疎水性) に属し、Lは H(疎水性) に属し、Vは H(疎水性) に属し、Sは P(極性) に属する。

【0046】したがって、相互作用のパターンは、(H, H), (H, H), (H, P) である。

(2) 乳酸脱水素酵素の第24残基(T)について
環境との相互作用は、(T, V), (T, S), (T, S)。

【0047】Tは P(極性) に属し、Vは H(疎水性) に属し、Sは P(極性) に属する。

【0048】したがって、相互作用のパターンは、(P, H), (P, P), (P, P) である。

(3) グリセルアルデヒド-3リン酸脱水素酵素の第5残基(G)について

環境との相互作用は、(G, V)。

【0049】Gは P(極性) に属し、Vは H(疎水性) に属する。したがって、相互作用のパターンは、(P, H) である。

【0050】図6は、図5に示されたアミノ酸の分類に対しては、どのような相互作用のパターンが可能かを示している。本実施例では、相互作用のパターン(Am, Ak)と(Ak, Am)とは区別しないものとした。したがって、図5で4個の集合を定義したから、可能なパターン数は、 $((4 \times 3) / 2) + 4 = 10$ 通りである。

【0051】図7および図8は、本発明の実施例による出力の例を示している。この例では、図4に示すアラインメントの各位置について、3個すべての局所構造に出現している環境との相互作用のパターンがあった場合に、そのパターンを持った環境との相互作用を出力している。

【0052】例えば、アラインメントの5番目の位置に出現しているパターンは、上述したように、アルコール脱水素酵素では(H, H), (H, H), (H, P), 乳酸脱水素酵素では(P, H), (P, P), (P, P), グリセルアルデヒド-3リン酸脱水素酵素では(P, H)である。したがって、図6に示されている10通りの可能なパターンのうち、3個すべての局所構造に出現しているのは、(H, P)のみである(前述のように(H, P)と(P, H)は本実施例では区別していない)。なお、3個の局所構造のすべてに共通する環境との相互作用のパターンが1つも無いようなアラインメントの位置については、図7および図8では何も示していない。

【0053】上述の実施例では、各アミノ酸残基の接触を、側鎖原子間の接触のみを考慮して判定したが、側鎖と主鎖の全原子の接触を考慮してもよい。また、上述の実施例では、アミノ酸残基間の接触を、各原子の座標を中心とする球を用いて判定したが、その他、アミノ酸残基間の空間的な近接関係を判定するための任意の特定の方法を用いてよい。

【0054】蛋白質分子の座標データは、ユーザーによって与えられた任意のデータでよい。アミノ酸の分類に当って、アミノ酸のどのような性質を考慮し、いくつの集合を定義するかは任意である。このようなアミノ酸の分類情報を、図1に示す入力装置10から動的に入力するようにしてもよい。

【0055】上述の実施例では、相互作用のパターン

(Am, Ak) と (Ak, Am) は区別しないものとしたが、区別してもよい。共通パターン判定処理部17が使用するパラメタNtについては、本実施例中の具体例では、Nt=Nと設定してあるが、Ntは1以上N以下の任意の整数値をユーザーが定義してよい。

【0056】

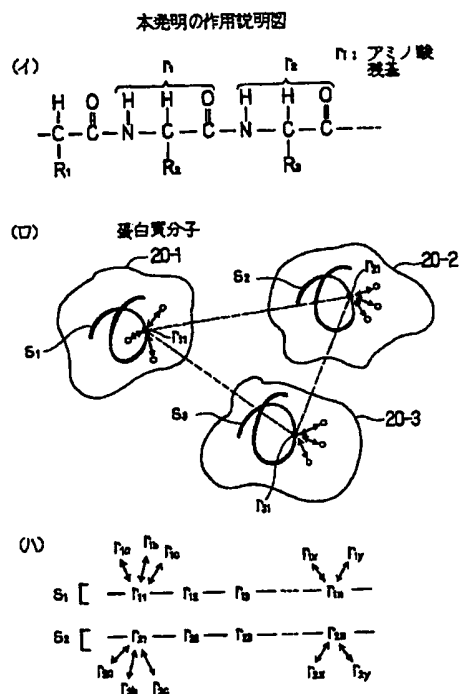
【発明の効果】以上説明したように、本発明によれば、複数の局所構造間に共通するアミノ酸配列上のパターンの特徴づけを行なう際に、局所構造内のみならず、局所構造を取り巻く環境を形成するアミノ酸残基との相互作用のパターンをも特徴づけることが可能となる。また、立体図を詳細に吟味するなどの主観が混じりやすい上に手間のかかる作業を介在させずに、アラインメントと座標データさえ入力すれば後は自動的に結果が出力されるので、大量のデータ処理が可能になり、またパラメータを変更するなどの試行錯誤を要するような解析を行う場合にも、所定の手順に従って組織的に行うことができるようになる。したがって、本発明は、アミノ酸配列を立体構造へと結び付ける経験則の構築に役立ち、立体構造予測法の発展に寄与するところが多い。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の原理説明図である。

【図2】本発明の作用説明図である。

【図2】



【図3】本発明の実施例の処理説明図である。

【図4】本発明の実施例に係る局所構造のアラインメントの例を示す図である。

【図5】本発明の実施例に係るアミノ酸の分類例を示す図である。

【図6】本発明の実施例における可能な相互作用のパターンを示す図である。

【図7】本発明の実施例による出力の例を示す図である。

【図8】本発明の実施例による出力の例を示す図である。

【符号の説明】

- 10 入力装置
- 11 処理装置
- 12 アラインメント入力処理部
- 13 座標データ入力処理部
- 14 相互作用検出処理部
- 15 アミノ酸分類管理部
- 16 相互作用パターン判定処理部
- 17 共通パターン判定処理部
- 18 相互作用パターン出力処理部
- 19 出力装置

【図5】

アミノ酸の分類例

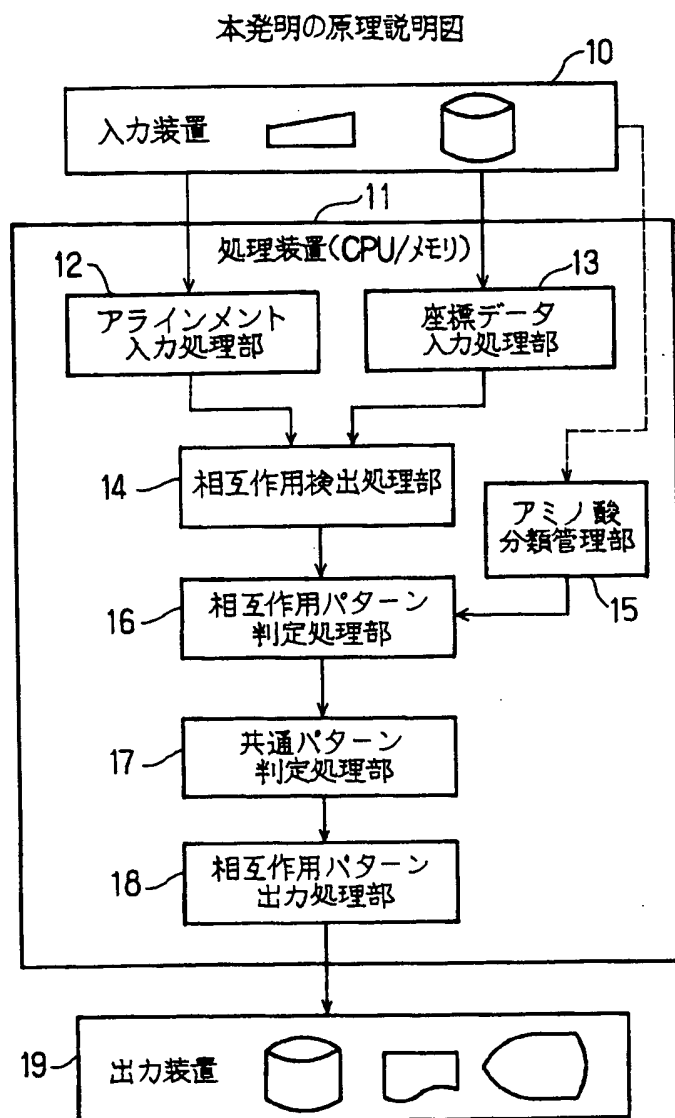
H (疎水性)	= {A, F, I, L, M, P, V}
P (極性)	= {C, G, H, N, Q, S, T, W, Y}
+ (正の電荷)	= {K, R}
- (負の電荷)	= {D, E}

【図6】

可能な相互作用のパターン

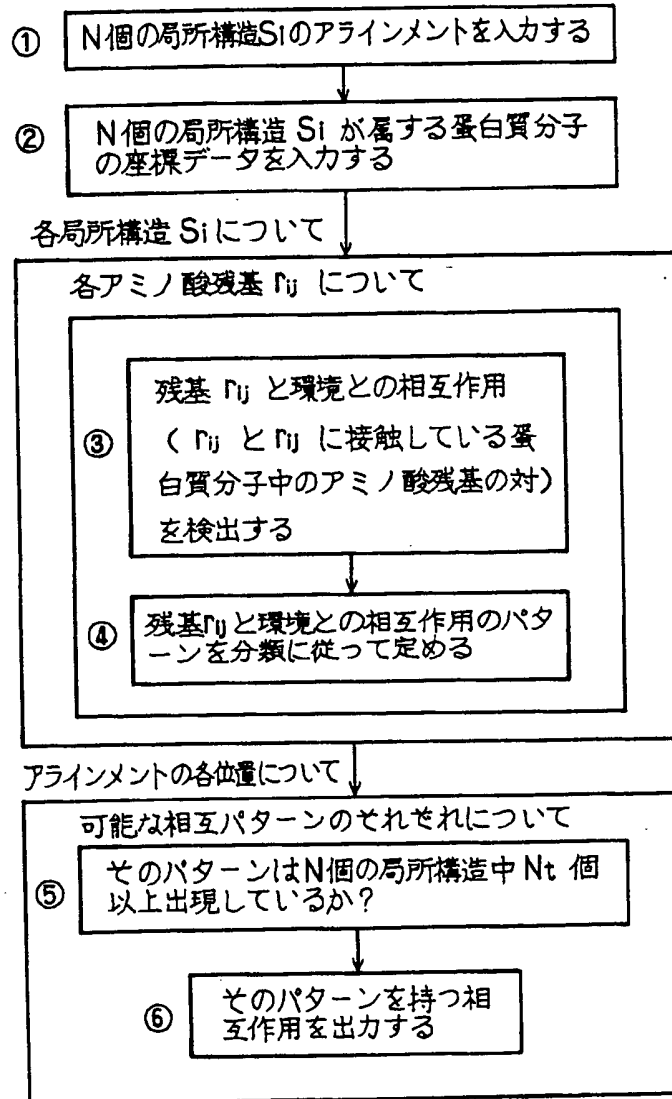
{H, H}	: {H, P}	: {H, +}	: {H, -}
{P, P}	: {P, +}	: {P, -}	
{+, +}	: {+, -}		
{-, -}			

【図1】



【図3】

実施例の処理説明図



【図4】

局所構造のアラインメントの例

アルコール脱水素酵素の	第192残基 - 第236残基:
乳酸脱水素酵素の	第 20残基 - 第 69残基:
グリセルアルデヒド - 3リン酸脱水素酵素の	第 2残基 - 第 46残基:
GSTCAVF6LG6VGLSVIMGCKAAGA - ARI - IGVDINK ---- DKFAKAKEVG	
YNKITVVGVGAVGMACAISILMKDLADEV - ALVDVMEDKLGEMMDLQHGS	
-VKVGINGFGRI6RNVFRAALKNPD - IEVVAVNDLTD ---- ANTLAHLKY	

【図7】

出力の例

アルコール脱水素酵素 (ADH)
 乳酸脱水素酵素 (LDH)
 グリセルアルデヒド-3リン酸脱水素酵素 (GPD)

===== POSITION 5 相互作用のパターン: (H、P) =====

ADHの第196残基 (A) と {第265残基 (S)}
 LDHの第24残基 (T) と {第51残基 (V)}
 GPDの第5残基 (G) と {第89残基 (V)}

===== POSITION 6 相互作用のパターン: (H、H) =====

ADHの第197残基 (V) と {第207残基 (V)}、第208残基 (I)}
 LDHの第25残基 (V) と {第50残基 (L)}
 GPDの第6残基 (I) と {第17残基 (F)}、第28残基 (V)}

===== POSITION 9 相互作用のパターン: (H、H) =====

ADHの第200残基 (L) と {第208残基 (I)}、第232残基 (A)}
 LDHの第28残基 (V) と {第33残基 (M)}、第50残基 (L)}
 GPDの第9残基 (F) と {第17残基 (F)}、第31残基 (V)}、第58残基 (L)}

【図8】

出力の例

=====

POSITION 16 相互作用のパターン: (H、P)

=====

A D H の第207残基 (V) と {第179残基 (G)、第182残基 (S)、第204残基 (G)}
 L D H の第35残基 (C) と {第253残基 (V)}
 G P D の第16残基 (V) と {第319残基 (S)}

=====

POSITION 17 相互作用のパターン: (H、H)

=====

A D H の第208残基 (I) と {第197残基 (V)、第200残基 (L)}
 L D H の第36残基 (A) と {第50残基 (L)}
 G P D の第17残基 (F) と {第6残基 (I)、第9残基 (F)、第28残基 (V)、第44残基 (L)}

=====

POSITION 19 相互作用のパターン: (H、P)

=====

A D H の第210残基 (G) と {第183残基 (A)、第184残基 (V)、第213残基 (A)}
 L D H の第38残基 (S) と {第254残基 (A)}
 G P D の第19残基 (A) と {第320残基 (H)}

=====

POSITION 31 相互作用のパターン: (H、H)

=====

A D H の第220残基 (I) と {第241残基 (V)、第262残基 (V)}
 L D H の第49残基 (A) と {第78残基 (V)}
 G P D の第30残基 (A) と {第87残基 (I)}